



TITLE:

Nelson流の確率過程量子化法によるトンネル時間の考察(ポスター・セッション・プログラム,第3回『非平衡系の統計物理』シンポジウム(その2),研究会報告)

AUTHOR(S):

今福, 健太郎; 大場, 一郎; 山中, 由也

CITATION:

今福, 健太郎 ...[et al]. Nelson流の確率過程量子化法によるトンネル時間の考察(ポスター・セッション・プログラム,第3回『非平衡系の統計物理』シンポジウム(その2),研究会報告). 物性研究 1996, 66(2): 312-325

ISSUE DATE:

1996-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/95730>

RIGHT:

Nelson 流の確率過程量子化法による トンネル時間の考察

早大理工 今福健太郎 大場一郎

早大学院 山中由也

Nelson 流の実時間確率過程量子化法をもちいたトンネル現象の解析を行う。

Nelson 流のアプローチは各試行毎の記述を探る可能性をもつものであり、量子力学に新しい視点を与えている。我々は、このアプローチを用いていわゆるトンネル時間を定義し、簡単な場合について数値計算による定量的解析を行った。

1. はじめに

「障壁をトンネリングするのにどれくらい時間がかかっているだろうか?」という疑問は決して新しい問題ではない [1-7]。例えば 1950 年代にボームやウイグナーが散乱の位相のずれのエネルギー依存から散乱過程での時間の遅れが評価できることを指摘しているが [4]、比較的アカデミックな問題とされてきた。しかし各種走査型プローブ顕微鏡をもちいた物性物理が盛んに研究され始めたこと、量子宇宙論での宇宙創世紀における量子宇宙のトンネリングの可能性が議論され始めていることなどから、この問題は極めて緊急の問題となっている。このような背景のもと、1980 年代から非常に多くの研究が行われ [8-21]、代表的なものには障壁中の存在確率密度を入射フラックスで割り算して定義される *dwell time* [10] や、ポテンシャルに周期的な摂動を加えて透過確率を計算し、その振る舞いと摂動の周期の関係により定義される *Büttiker-Landauer time* [8]、古典的な運動方程式を解析接続して得られるインスタントンから定義される *Complex time* [12-14] などがある。しかし、どの定義も物理的な意味が不明瞭であり障壁通過時間そのものであるとは考えられておらず、いわゆるトンネル時間の定義やその表現方法について世界的なコンセンサスは得られていない。

この問題の困難の原因は、観測にあらわれる「時間」が量子力学の枠組みではただのパラメータであって q -数ではないことにある。換言すれば、このような量をどのように量子力

学から導出するのか(量子力学の枠組は q -数の期待値を与える)、それがこの研究のテーマでもある。

そこで我々は Nelson 流の実時間確率過程量子化 [22] を用いてトンネル現象を解析、数値計算を実行することにより、この問題の定性的、定量的な研究を行った。

2. NELSON 流確率過程量子化法

ここでは、我々の用いた Nelson 流の確率過程量子化法について簡単に触れておく。

波動関数の絶対値二乗 $|\psi(\vec{x}, t)|^2$ に対応する拡散過程が、

$$\vec{b}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \nabla (\text{Im} + \text{Re}) \ln \psi(\vec{x}, t) \quad (1)$$

をドリフト項とし $\frac{\hbar}{m}$ を拡散定数とする前進 Fokker-Planck 方程式

$$\frac{\partial P(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \{ \vec{b}(\vec{x}, t) P(\vec{x}, t) \} + \frac{\hbar}{2m} \Delta P(\vec{x}, t) \quad (2)$$

で書けることは、確率流の連続の式

$$\frac{\partial |\psi(\vec{x}, t)|^2}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t), \quad (3)$$

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^\dagger(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) - (\vec{\nabla} \psi^\dagger(\vec{x}, t)) \psi(\vec{x}, t)). \quad (4)$$

との対応から明らかである。さらに (2) は、Ito 型確率微分方程式

$$dx_i(t) = b_i(\vec{x}(t), t) dt + dw_i(t), \quad (dt > 0) \quad (5)$$

$$\langle dw_i(t) \rangle = 0, \quad \langle dw_i(t) dw_j(t) \rangle = \frac{\hbar}{m} \delta_{ij} dt. \quad (6)$$

で表される実時間の確率過程として表現することが出来るので、我々は与えられた波動関数 $\psi(\vec{x}, t)$ より、確率過程として $|\psi(\vec{x}, t)|^2$ を再現することが出来る。 $\langle \dots \rangle$ はアンサンブルアベレージを表す。

同様に後退 Fokker-Planck 方程式を考えれば

$$b_{*i}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x_i} (\text{Im} - \text{Re}) \log \psi(\vec{x}, t) \quad (7)$$

をドリフト項とする

$$\frac{\partial P(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \{ \vec{b}_*(\vec{x}, t) P(\vec{x}, t) \} - \frac{\hbar}{2m} \Delta P(\vec{x}, t) \quad (8)$$

が対応しているので、Ito 型の確率微分方程式

$$dx_i(t) = b_{*i}(\vec{x}(t), t)dt + dw_{*i}(t), \quad (dt < 0) \quad (9)$$

$$\langle dw_{*i}(t) \rangle = 0, \quad \langle dw_{*i}(t) dw_{*j}(t) \rangle = -\frac{\hbar}{m} \delta_{ij} dt \quad (10)$$

で表される確率過程として再現することができる。

3. トンネル現象の解析

上記の Nelson 流の確率過程量子化を用い、トンネル現象の解析を行う。

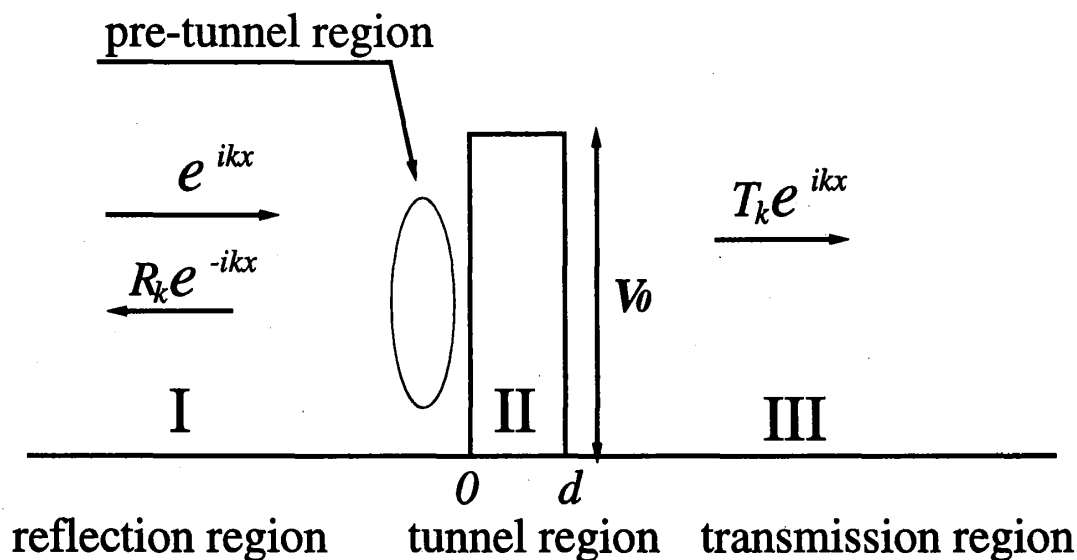


FIG. 1. 一次元箱型散乱問題

ここでは簡単のため、一次元の箱型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{in I} & (x < 0), \\ V_0 > 0 & \text{in II} & (0 < x < d), \\ 0 & \text{in III} & (d < x) \end{cases} \quad (11)$$

の左法投入問題(図1.)を扱うが、この方法は他のポテンシャルの場合や、高次元の問題に対する拡張も容易である。

3.1. 前進確率微分方程式による枠組

与えた系にたいし、時間依存の波動関数を求めて(5)による、時間発展を考える。このとき、確率変数 $x(t)$ のうち最終的に領域 III に到達する試行 $(x(t \rightarrow \infty) \in \text{III})$ 、すなわち透過する試行の集合として透過アンサンブル ET を定義する。さらにアンサンブルによるサンプルパスアベレージ

$$\langle x(t) \rangle_{ET} \equiv \langle x(t) \rangle_{\{x(t)|x(t \rightarrow \infty) \in \text{III}\}} \quad (12)$$

として平均透過経路を定義することができる。また、 $x(t) \in \text{II}$ である時間を *Passing time* と定義しアンサンブル ET を用いて、分布やその平均値を計算することが可能となり、さらにセクション4で触れるトンネル現象に特徴的なその他の時間も統計的に扱うことができる。同様にして反射する試行 $(x(t \rightarrow \infty) \in \text{I})$ のみからなる集合により反射アンサンブル ER を定義すれば、そのサンプルパスアベレージとして平均反射経路を定義することができる(図2.)。

$$\langle x(t) \rangle_{ER} \equiv \langle x(t) \rangle_{\{x(t)|x(t \rightarrow \infty) \in \text{I}\}} \quad (13)$$

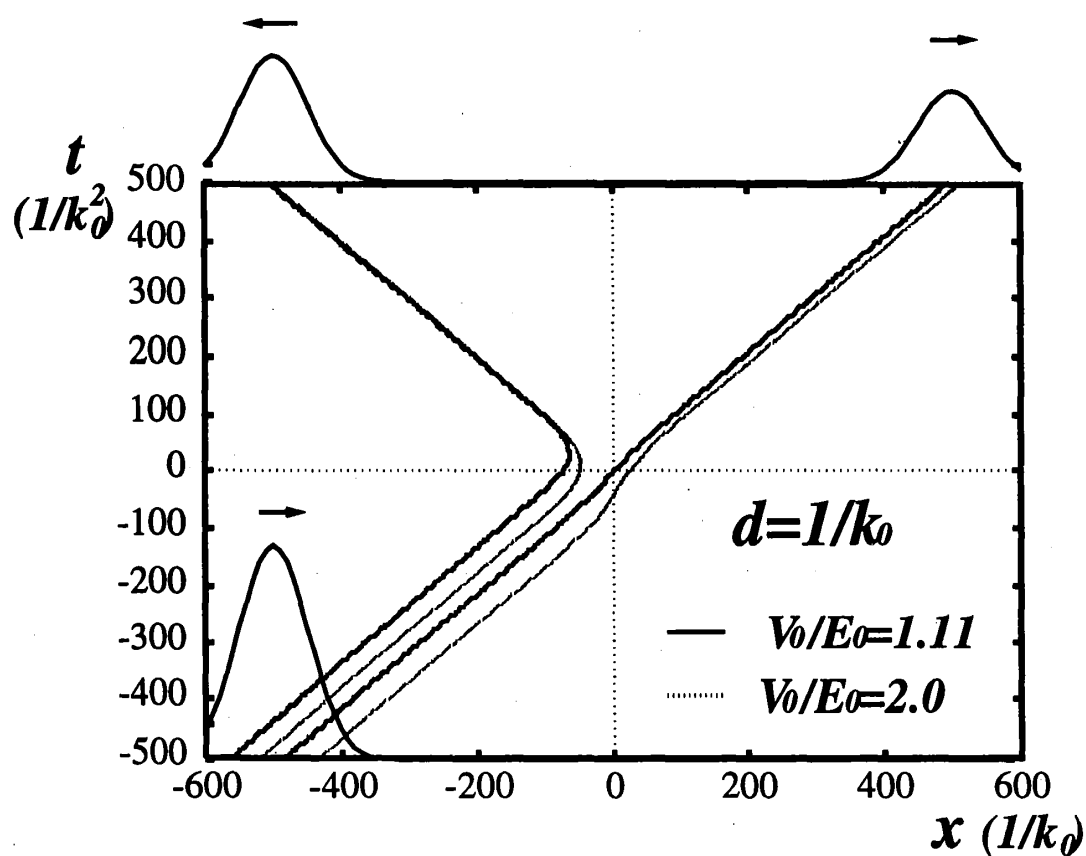


FIG. 2. 平均透過経路と平均反射経路

このようにふたつのアンサンブルが明確に定義されるためには $t \rightarrow \infty$ で透過波による確率分布と反射波による確率分布が空間的に分離している必要がある。そのためこの枠組では時間に依存した波動関数を扱わなければならない。

また、アンサンブル ET のサンプルの数は、当然、波動関数から計算した透過確率を再現する。(図 3.) は初期条件として入射波束の $|\psi(x, t)|^2$ をもつ確率過程 80 試行について、 ET のサンプル数を数えて各パラメータごとにプロットしたものである。

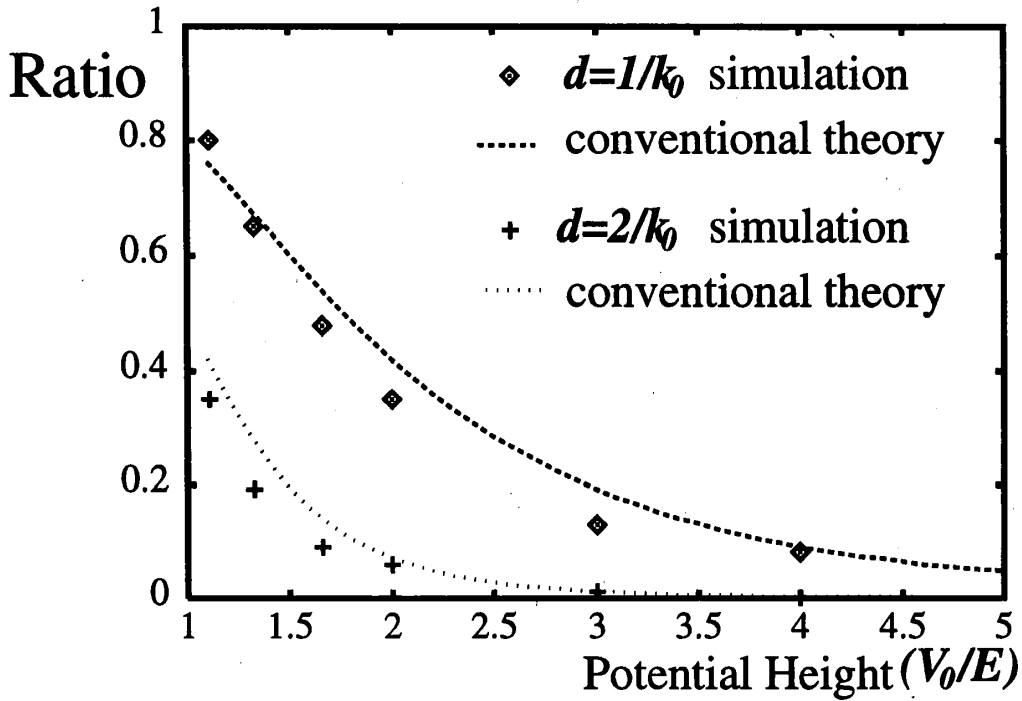


FIG. 3. サンプル数の比と波動関数から計算した反射確率

3.2. 後退確率微分方程式による枠組

実際のシミュレーションを考えると、特に透過確率の低いパラメータに対して、上述の方法は不利である。なぜならば透過してくるサンプルの数は透過確率に比例するので、効率よくサンプル数を稼ぐことができないからである。そこで理論的にはまったく同じことであるが、実際の計算のための工夫として後退確率微分方程式による解析を考える。

この方法では、確率変数の“初期”分布として $|\psi(x, s \rightarrow \infty)|^2$ を与え、(9) による未来から過去への時間発展をシミュレーションを実行する。透過サンプルは領域 III から“スタート”するもの、反射サンプルは領域 I から“スタート”するものとして定義される。この方法は透過確率に影響されず、十分な数のサンプルを集めることができる。

また、この方法をもとに透過アンサンプルや反射アンサンプルの振る舞いの解析的な表現を得ることも可能である。Fokker-Planck オペレータを

$$\hat{F}_\tau = -(\vec{\nabla} \cdot \vec{b}_*(\vec{x}, \tau) + \frac{\hbar}{2m} \Delta) \quad (14)$$

と定義すれば、(8) の形式的な解は

$$P(\vec{x}, t) = e^{-\int_t^s \hat{F}_r dr} P(\vec{x}, s), \quad (t < s) \quad (15)$$

と書くことができる。これは $y(s)$ から $x(t)$ への遷移確率（未来から過去への遷移であることに注意）が

$$\Gamma(\vec{x}, t; \vec{y}, s) = e^{-\int_t^s \hat{F}_r dr} \delta(\vec{x} - \vec{y}) \theta(s - t) \quad (16)$$

であることを示している。ところで、透過アンサンブルと反射アンサンブルの“初期”分布 $P_T(x, s)$ および $P_R(x, s)$ は、 $s \rightarrow \infty$ でトンネル領域に確率分布が存在しないことを仮定すると

$$P_T(x, s) = |\psi(x, s)|^2 \theta(x - d), \quad (17)$$

$$P_R(x, s) = |\psi(x, s)|^2 \theta(-x), \quad (18)$$

と書ける。(16)、(17) と (18) より有限な時間 $t < s$ に対して $P_T(x, t)$ 、 $P_R(x, t)$ が

$$P_T(x, t) = \int_d^\infty \Gamma(x, t; y, s) P_T(y, s) dy, \quad (19)$$

$$P_R(x, t) = \int_{-\infty}^0 \Gamma(x, t; y, s) P_R(y, s) dy \quad (20)$$

と定義できる。 t は波束がポテンシャルに到達する以前の時間も含んでいることに注意されたい。これらはトータルな確率分布 $P(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ と

$$P(x, t) = P_R(x, t) + P_T(x, t) \quad (21)$$

の関係を常に満たしている。また、 $P_T(x, t)$ や $P_R(x, t)$ を重み関数として計算される期待値はサブセクション 3.3.1 で導入された $\langle \dots \rangle_{ET}$ や $\langle \dots \rangle_{ER}$ に対応していて例えば

$$\langle x(t) \rangle_{ET} = \int_{-\infty}^\infty x P_T(x, t) dx, \quad (22)$$

$$\langle x(t) \rangle_{ER} = \int_{-\infty}^\infty x P_R(x, t) dx, \quad (23)$$

である。

4. トンネル時間の評価

ここでは、前のセクションでの議論に基づきシミュレーションを実行し、いわゆるトンネル時間を評価する。これらの枠組では時間に依存する波動関数を、あらかじめ用意しておく必要がある。波動関数 $\psi(x, t)$ は運動量空間の重み関数を $A(k)$ として定常解 $\varphi_k(x)$ の重ね合わせにより、

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \varphi_k(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} dk, \quad (24)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (25)$$

として得られる。(11) に対して $E < V_0$ と左方投入の境界条件のもとで $\varphi_k(x)$ は

$$\varphi_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} + R_k e^{-ikx} & \text{in I,} \\ C_k e^{\kappa x} + D_k e^{-\kappa x} & \text{in II,} \\ T_k e^{ikx} & \text{in III,} \end{cases} \quad (26)$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, \quad (27)$$

$$\begin{bmatrix} R_k \\ T_k \\ C_k \\ D_k \end{bmatrix} = \frac{1}{2k\kappa \cosh \kappa d + i(\kappa^2 - k^2) \sinh \kappa d} \begin{bmatrix} -i(\kappa^2 + k^2) \sinh \kappa d \\ 2k\kappa e^{-ikd} \\ k(\kappa + ik) e^{-\kappa d} \\ k(\kappa - ik) e^{\kappa d} \end{bmatrix} \quad (28)$$

と、解けることはよく知られている。今回は $A(k)$ として $k = k_0$ を中心とする実関数ガウス型とし

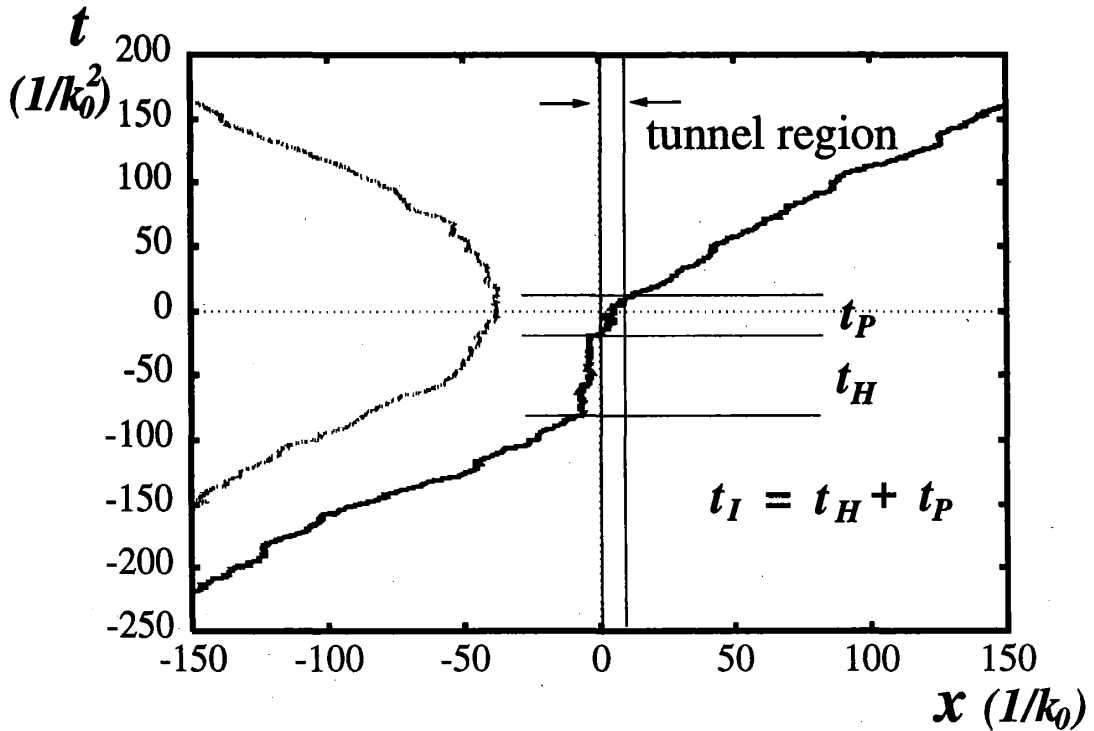
$$A(k) = A_{k_0}(k) = C \exp \left\{ -\frac{(k_0 - k)^2}{4\sigma^2} \right\}, \quad (29)$$

$\sigma = \frac{k_0}{100}$ とした。

4.1. *Passing time, Hesitating time, Interacting time*

(5) により時間発展した $x(t)$ の振舞をみると、透過する試行も反射する試行も入射して領域 I をほとんど自由粒子のように進行する。やがて、波束がポテンシャルにオーバーラップするようになると、軌道が歪められポテンシャルの手前で停滞するようになる。このとき波動関数を見ると入射波と反射波の激しい干渉が存在し確率変数 $x(t)$ が干渉縞のなかにトラップされているのがわかる。そのため、透過確率が高く干渉がほとんど見られない場合には、この停滞はほとんど見られない。最終的に、波束が透過部分と反射部分とに分かれるとそれぞれに運ばれるように、確率変数 $x(t)$ は透過、あるいは反射する (図 4.)。

このような確率変数の振る舞いから我々はトンネル領域の手前で停滞している時間を *Hesitating time* t_H と定義し、トンネル領域に存在する時間 *Passing time* t_P との足し算により *Interacting time* t_I を $t_I = t_H + t_P$ と定義した。

FIG. 4. *Passing time, Hesitating time, Interacting time*

ここではこれらの量を透過アンサンブルにわたり平均した量 $\langle t_H \rangle_{ET}$ 、 $\langle t_P \rangle_{ET}$ 、

$\langle t_I \rangle_{ET}$ について、パラメータ依存性を議論する。以下の結果は(9)を使って、“初期”分布を $P_T(x, s \rightarrow \infty)$ のピークに集中して計算したものである。

$\langle t_P \rangle_{ET}$ は、ポテンシャルの厚さが波長と同程度 ($\frac{d}{k_0} = 1$) のときには、ポテンシャルの高さに対して大きく変化しないが厚いポテンシャル ($\frac{d}{k_0} = 10$) のときには減少していく様子が見られる(図5.)。これは $\kappa_0 d \gg 1$ のとき領域IIのなかのドリフトが $\frac{\hbar \kappa_0}{m}$ に近づいて、ポテンシャルが高いときには強い力で押し出されるからである。このように近似できる場合はサブセクション44.2で、より詳しく議論する。

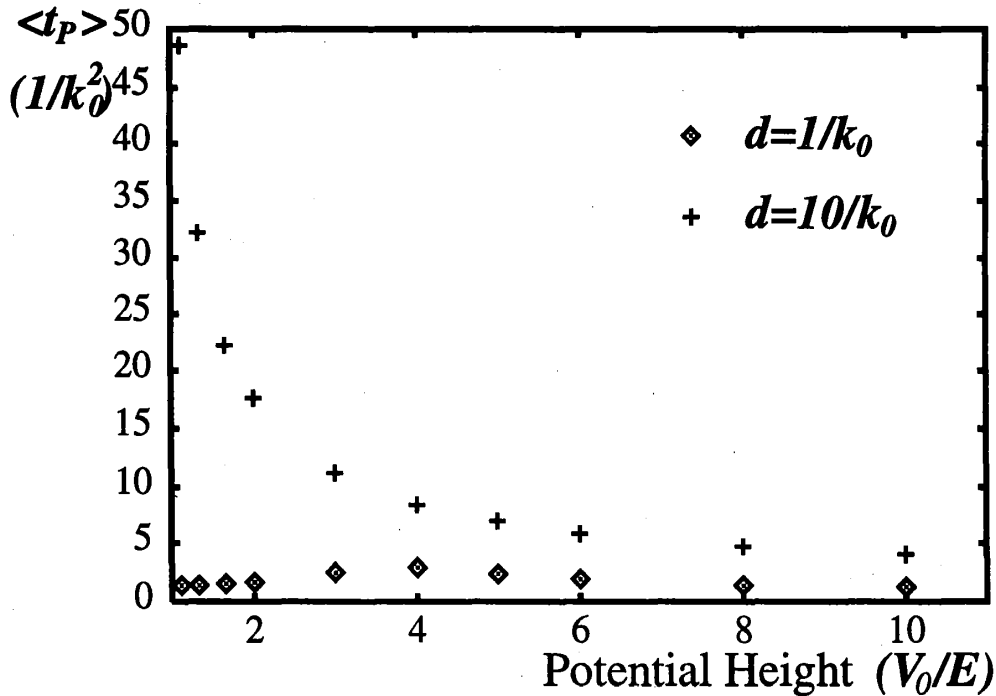


FIG. 5. Passing time の平均値

$\langle t_H \rangle_{ET}$ と $\langle t_P \rangle_{ET}$ はポテンシャルの高さが入射エネルギーとほぼ同じ程度 ($\frac{V_0}{E_0} \sim 1$) の場合にはほとんど等しい。逆に、($\frac{V_0}{E_0} \gg 1$) の場合には $\langle t_H \rangle_{ET}$ が $\langle t_P \rangle_{ET}$ に比べて優勢となり、透過確率の低いパラメータ領域で $\langle t_H \rangle_{ET}$ の値が飽和するのがわかる(図6)。この飽和した値は、波束の長さ ($\sim \frac{\hbar}{\sigma}$) を入射波束の群速度 v_g で割り算した値で、おおよその評価が可能である。これは、前述のように、波束がポテンシャルにオーバーラップしている間には、確率変数 $x(t)$ がポテンシャルの近傍で激しく変化する干渉縞に起因する“量子力学的ポテンシャル”にトラップされるためである。

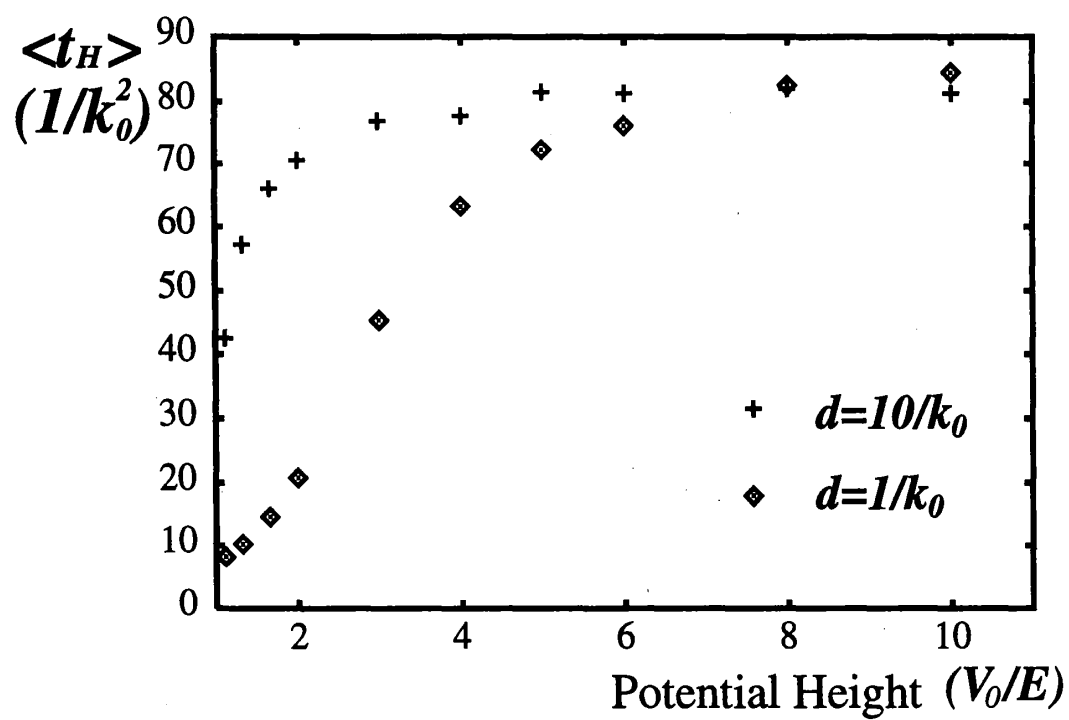


FIG. 6. Hesitating time の平均値

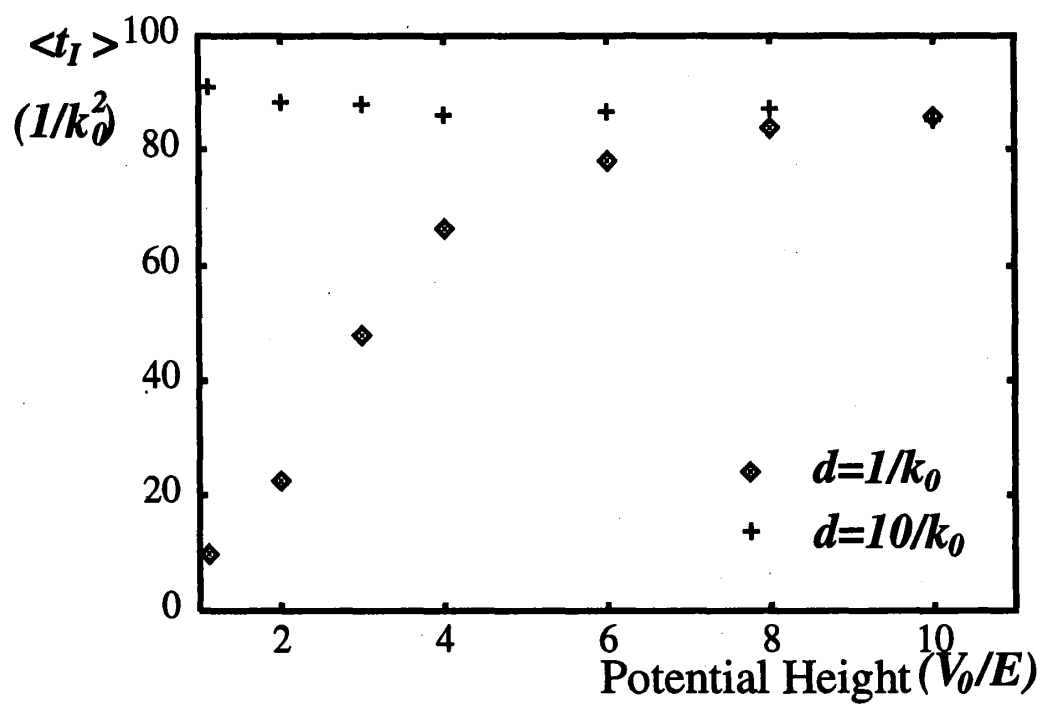


FIG. 7. Interacting time の平均値

4.2. $\kappa_0 d \gg 1$ の場合の *Passing time*

ここでは、 $\kappa_0 d \gg 1$ の場合の *Passing time* について、解析的な評価をおこなう。前述のように我々の枠組は、時間依存する波動関数に対してのみ意味があり、本来定常的な扱いをすることは出来ない。しかし波束がポテンシャル領域に比べ十分おおい場合を考えポテンシャル中の波動関数が定常的に扱える場合を考える。さらに $\kappa_0 d \gg 1$ を満たしている時は、セクション 3.3.2 で考察した時間後退 Fokker-Planck 方程式のドリフト項は領域 II のほとんどで、 $b_*(x) = \frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \ln \varphi_{k_0}(x) \sim \frac{\hbar \kappa_0}{m}$ とすることができる。即ち (8) を

$$\frac{\partial P_t(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar \kappa_0}{m} \frac{\partial P_t(x, t)}{\partial x} - \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 P_t(x, t)}{\partial x^2}, \quad (t < 0) \quad (30)$$

と書くことで、 $P_t(x, 0) = \delta(x - d)$ に対し

$$P_t(x, t) = \sqrt{\frac{2m\pi}{-\hbar t}} \exp\left\{-\frac{(x - d + \frac{\hbar \kappa_0}{m} t)^2}{\frac{\hbar t}{2m}}\right\}, \quad (t < 0) \quad (31)$$

と解くことができる。この解のなかに見られるふたつの特徴的時間は、ひとつが分布がトンネルの幅まで広がる時間 $t_d \sim \frac{md^2}{\hbar}$ であり、もうひとつは分布の中心がトンネル領域を抜ける時間 $t_c \sim \frac{md}{\hbar \kappa_0}$ である。 $\kappa_0 d \gg 1$ を考えると $t_d \gg t_c$ であり t_c が “*Passing time*” であると考えることができる。これは、時間をユークリッド化した古典的な運動方程式から期待される値や、Büttiker-Landauer time [8] と同じ結果を与える。

5. まとめ

今回は、一次元トンネル現象について量子力学を実時間依存の確率過程とみなす Nelson 流の確率過程量子化をもちいて解析をおこない透過アンサンブル、反射アンサンブルを定義し、さらに箱型ポテンシャルにの場合について具体的に数値計算を実行し確率変数 $x(t)$ のふるまいからトンネル現象に特徴的な時間として “*Passing time*”、“*Hesitating time*”、“*Interacting time*” を定義、そのパラメータ依存を調べた。

この方法は滑らかなポテンシャル問題についても “*Passing time*” と “*Hesitating time*” の区別や、その場合の物理的な意味について検討が必要であるが枠組はこのまま利用できる。また高次元の散乱問題についても拡張は容易であり、理論的な困難は存在しない。

実際の実験での測定を考えると、自由粒子との到達時刻の比較、あるいはこれに類するような実験では“*Interacting time*”が得られ、トンネル中に存在する時間を計る実験であれば“*Passing time*”を得ることになろう。

- [1] E. U. Condon, *Rev. Mod. Phys.* **3**, 43 (1931).
- [2] L. A. MacColl, *Phys. Rev.* **40**, 621 (1932).
- [3] L. Eisenbud, *Ph.D. Thesis*, Princeton University (1948).
- [4] E. P. Wigner, *Phys. Rev.* **98**, 145 (1955).
- [5] T. E. Hartman, *J. App. Phys.* **33**, 3427 (1962).
- [6] A. I. Baz', *Sov. J. Nucl. Phys.* **5**, 161 (1967).
- [7] V. F. Rybachenko, *Sov. J. Nucl. Phys.* **5**, 635 (1967).
- [8] M. Büttiker and R. Landauer, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1739 (1982).
- [9] H. W. Lee and M. O. Scully, *Found. Phys.* **13**, 61 (1983).
- [10] M. Büttiker, *Phys. Rev.* **B27**, 6178 (1983).
- [11] S. Collins, D. Lowe, and J. R. Barker, *J. Phys. C* **20**, 6213 (1987).
- [12] D. Sokolovski and L. M. Baskin, *Phys. Rev.* **A36**, 4604 (1987).
- [13] E. H. Hauge and J. A. Støvneng, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 917 (1989).
- [14] H. A. Fertig, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2321 (1990).
- [15] D. Sokolovski and J. N. L. Connor, *Phys. Rev.* **A47**, 4677 (1993).
- [16] V.S. Olkhovsky and E. Recami, *Phys. Rep.* **214**, 339 (1992).
- [17] C. R. Leavens and G. C. Aers. In “*Scanning Tunneling Microscopy III*,” R. Wiesendanger and

H.-J. Güntherodt, eds., Springer-Verlag, Berlin (1993).

[18] T. Martin and R. Landauer, Phys. Rev. **A47**, 2023 (1993).

[19] S. Brouard, R. Sala, and J. G. Muga, Phys. Rev. **A49**, 4312 (1994).

[20] R. Landauer and Th. Martin, Rev. Mod. Phys. **66**, 217 (1994).

[21] A. M. Steinberg, Phys. Rev. Lett. **74**, 2405 (1995).

[22] E. Nelson Phys. Rev. **150**, 1079 (1966).